

Projekt ten poświęcony jest teoretycznym badaniom struktury elektronowej i magnetycznej materiałów dwuwymiarowych (2D) opartych na borze i jego związkach. Różne parametry badanych materiałów mogą być dostrajane, umożliwiając kontrolowany i odwracalny dostęp do ich różnorodnych faz kwantowych. Badania nowych materiałów o unikalnych właściwościach elektronowych i magnetycznych stanowią najbardziej atrakcyjną gałąź współczesnej fizyki materii skondensowanej. Przykładem takich systemów jest materiał Diraca, w którym dynamika elektronów opisana jest równaniem Diraca, a nie równaniem Schrödingera. W tym przypadku relatywistyczna masa fermionów może wynosić zero, prowadząc do liniowej zależności dyspersji (tzw. stożki Diraca w przestrzeni odwrotnej). Materiały te reprezentowane są przez bogatą gamę tzw. materiałów topologicznych, np. izolatory topologiczne (TI), topologiczne półmetale (TSM) czy topologiczne nadprzewodniki (TS) o dużych możliwościach zastosowania w różnych dziedzinach nauki. Oprócz zastosowań w różnych urządzeniach, oczekiwane jest, że materiały te mogą realizować takie nieuchwytnie dotąd zjawiska jak monopole magnetyczne czy fermiony Majorany. Osiągnięcia te wymagają jednak możliwość manipulowania strukturą elektronową i magnetyczną materiałów topologicznych.

Głównym celem niniejszego projektu jest poszukiwanie dwuwymiarowych izolatorów topologicznych z szerokimi przerwami energetycznymi oraz realizacja pierwszego w historii monoatomowego dwuwymiarowego półmetal z linią węzłową. Aby osiągnąć ten cel muszą być spełnione co najmniej trzy warunki. Po pierwsze, takie materiały 2D muszą mieć nieskomplikowaną budowę chemiczną i być uznanymi, na drodze badań teoretycznych, materiałami należącymi do klasy materiałów 2D TI [1]. Po drugie, rozpatrywane materiały 2D muszą być względnie prosto syntetyzowalne wykorzystując kontrolowane metody wzrostu. Wreszcie, ponieważ badane zjawiska kwantowe są dość złożone, preferowane będą materiały, które były przez nas wcześniej badane teoretycznie [2]. Materiały, o których mowa, to dwuwymiarowe formy boru zwane borofenami. Borofen, choć podobny do grafenu pod względem lekkości i wytrzymałości, posiada cechy go wyróżniające, które przyczyniają się do jego nowatorskich, pożądaných właściwości. Najważniejszą z nich jest jego struktura, która składa się z mieszanych motywów trójkątnych i heksagonalnych (luk atomowych w strukturze o sieci heksagonalnej). Dostosowując koncentrację luk, możemy dostosować jego właściwości elektryczne i mechaniczne [3].

- [1] M. Ou, X. Wang, L. Yu, C. Liu, W. Tao, X. Ji, and L. Mei, *The Emergence and Evolution of Borophene*, Adv. Sci., 2001801 (2021).
- [2] N. Gonzalez Szwacki and I. Matsuda, *A Historical Review of Theoretical Boron Allotropes in Various Dimensions BT - 2D Boron: Boraphene, Borophene, Boronene*, in edited by I. Matsuda and K. Wu (Springer International Publishing, Cham, 2021), pp. 1–25.
- [3] T. Tarkowski, N. Gonzalez Szwacki, and M. Marchwiany, *Structure of Porous Two-Dimensional Boron Crystals*, Phys. Rev. B **104**, 195423 (2021).